

Benchmark solution for a three-dimensional mixed convection flow

Xavier NICOLAS¹, Marc MEDALE², Stéphane GLOCKNER³, Stéphane GOUNAND⁴

¹Université Paris-Est, Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME UMR 8208 CNRS, 5 bd Descartes, 77454 Marne-la-Vallée Cedex 2, France (xavier.nicolas@univ-paris-est.fr)

²IUSTI, UMR 6595 CNRS, 5 rue Enrico Fermi, Technopôle de Château-Gombert, 13453 Marseille Cedex 13, France (marc.medale@polytech.univ-mrs.fr)

³Université de Bordeaux, IPB ENSCBP, CNRS UMR 5295, Institut I2M, 16 av. Pey-Berland, 33 607 Pessac Cedex, France (glockner@enscbp.fr)

⁴CEA-Saclay, DEN, DM2S, SFME, LTMF, F-91191 Gif-sur-Yvette, France (stephane.gounand@cea.fr)

November 14, 2011

Objectifs

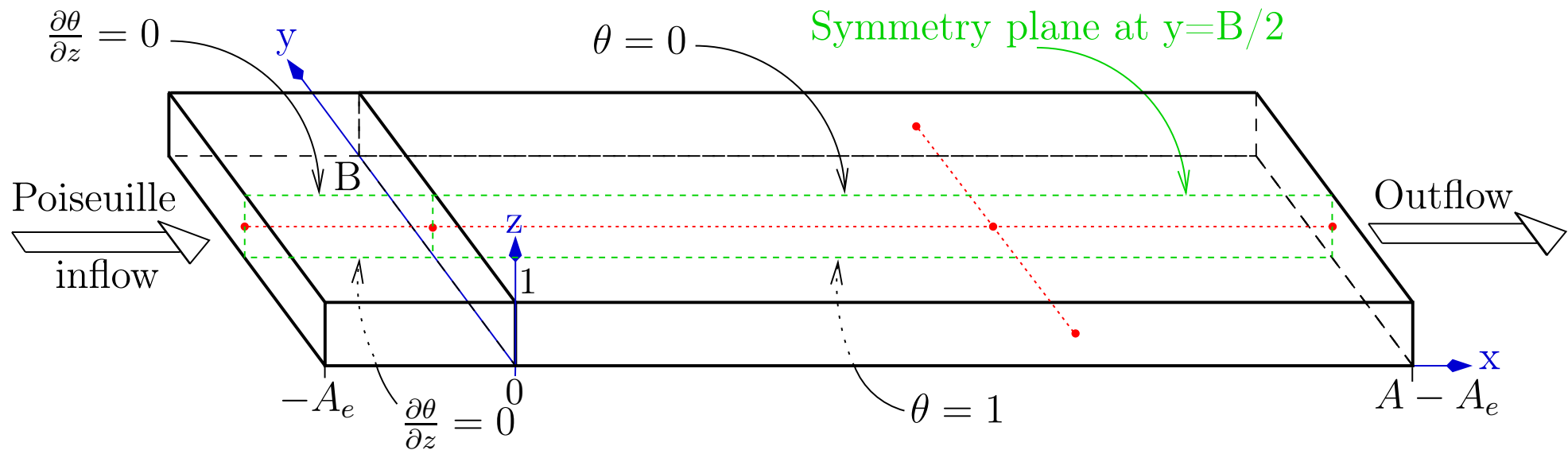
- Obtention d'une **solution de référence** pour un écoulement de **convection mixte 3D** ;
- Utilisation systématique de l'**extrapolation de Richardson** : quantifier l'erreur et obtenir une solution plus précise ;
- Appel à contributions [Medale and Nicolas, 2006] ;
- Publications [Nicolas et al., 2011c], [Nicolas et al., 2011a]
Rapport technique [Nicolas et al., 2011b].

Plan

1. Problème et démarche de résolution ;
2. Résultats obtenus ;
3. Explication des résultats : Singularité ;
4. Explication des résultats : Comportement de l'extrapolation de Richardson ;
5. Perspectives.

Démarche : Problème à résoudre (I)

Écoulement de convection mixte (Poiseuille-Rayleigh-Bénard) en cavité (ex. refroidissement de circuits intégrés)



Démarche : Équations (II)

Navier-Stokes incompressible + Boussinesq

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \vec{v} = 0 \\ \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \vec{v} + \frac{Ra}{Pr Re^2} \theta \vec{k} \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \theta = \frac{1}{Pr Re} \nabla^2 \theta \end{array} \right.$$

Paramètres adimensionnés

$$Pr = 0.7 \quad Re = 50 \quad Ra = 5000$$

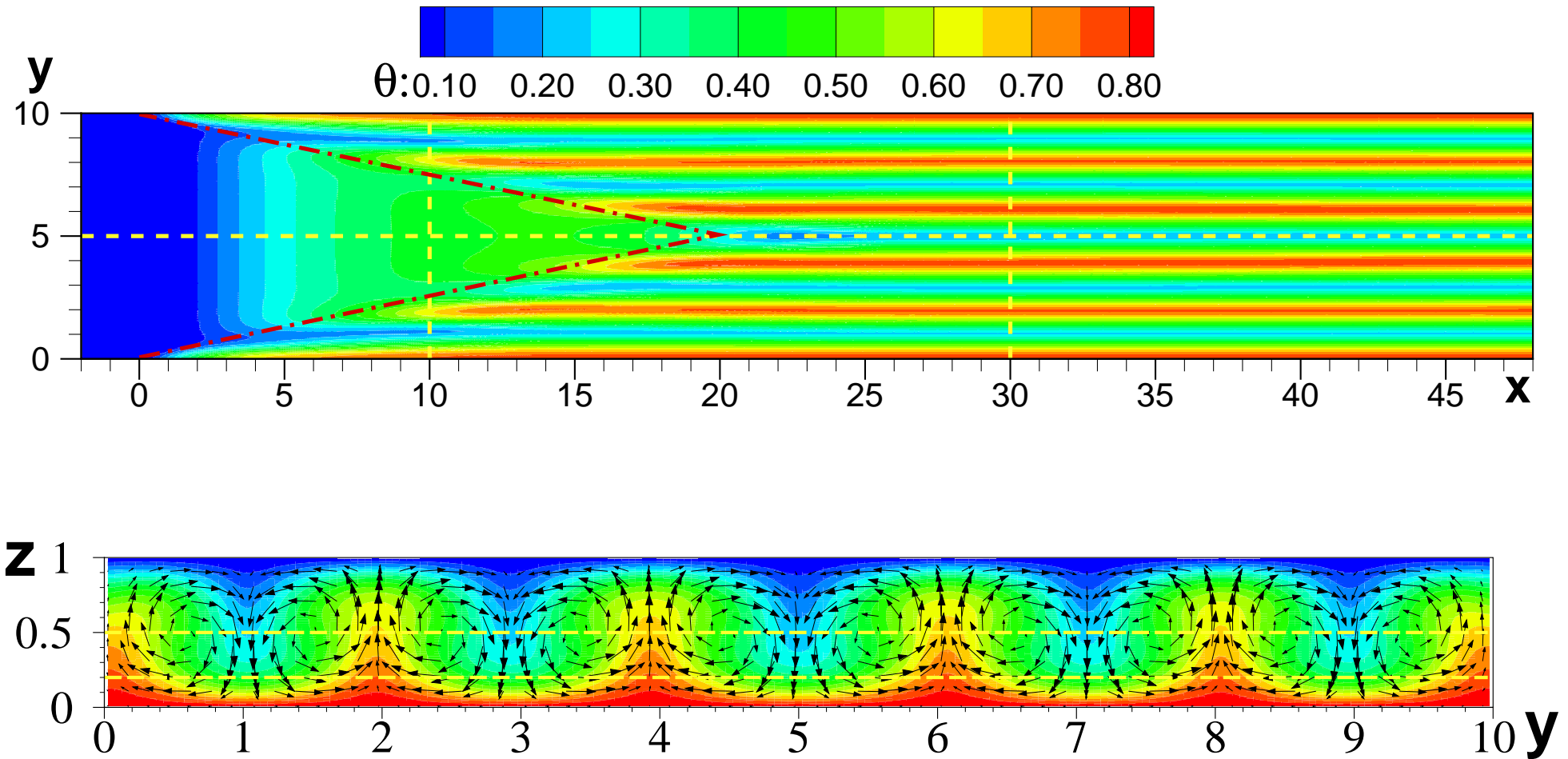
$$A = 50 \quad A_e = 2 \quad B = 10$$

Conditions aux limites

Dynamiques : Profil établi (Poiseuille) en entrée, conditions de sortie “libres”, vitesse nulle en paroi ;

Thermiques : $\theta = 0$ en entrée, conditions de sortie “libres”, zone d'établissement adiabatique, puis chauffage par le bas, refroidissement par le haut.

Démarche : Solution du problème (III)



Démarche : Méthodes de résolution (IV)

4 méthodes de résolution et codes différents :

- FD1** Différences finies centrées, vectorisées, ADI, matrices tridiagonales, méthode de projection continue (Goda) ;
- FE2** Éléments finis Q2/Q1, parallélisme distribué, décomposition de domaine (PETSc), méthode de projection continue (Guermond) ;
- FV3** Thétis, Volumes finis nodaux, vitesses aux faces, décentrement QUICK température, parallélisme distribué (Hypra), méthode de projection continue (Timmermans) ;
- FE4** Castem, Éléments finis Q2/P1nc, parallélisme partagé, AGMG (Notay), méthode de projection algébrique (Quarteroni).

Démarche : Paramètres des contributeurs (V)

Contributor	$N_x \times N_y \times N_z$ [symmetry]	Δt	User time [computer type (organism/lab)]	Consistency orders α°
MSME, FD1	$400 \times 134 \times 40$	0.01	36 <i>min</i> on 1 processor	2 for θ, u, v, w ; 2 for p
	$600 \times 200 \times 60$	0.01	2 <i>h</i> 20 on 1 processor	
	$800 \times 268 \times 80$	0.002	25 <i>h</i> on 1 processor	
	$1200 \times 400 \times 120$ [no]	0.002	100 <i>h</i> on 1 processor [NEC SX5 (IDRIS)]	
IUSTI, FE2	$601 \times 121 \times 41$	0.01	19 <i>min</i> on 60 cores	3 for θ, u, v, w ; 2 for p
	$901 \times 181 \times 61$	0.01	1 <i>h</i> 40 on 150 cores	
	$1351 \times 271 \times 91$ [yes]	0.005	43 <i>h</i> 15 on 225 cores [IBM SP6 (IDRIS)]	
I2M Institute, FV3	$601 \times 161 \times 41$	0.1	8 <i>h</i> on 152 cores	2 for θ, u, v, w ; 2 for p
	$901 \times 241 \times 61$	0.1	12 <i>h</i> on 152 cores	
	$1351 \times 361 \times 91$ [yes]	0.1	56 <i>h</i> on 152 cores [ALTIX ICE 8200 (I2M Inst.)]	
CEA, FE4	$601 \times 121 \times 49$	0.5	200 <i>h</i> on 8 cores	3 for θ, u, v, w ; 2 for p
	$751 \times 151 \times 61$	0.5	400 <i>h</i> on 8 cores	
	$801 \times 161 \times 65$	0.5	450 <i>h</i> on 8 cores	
	$1001 \times 201 \times 81$ [yes]	0.5	1600 <i>h</i> on 8 cores [PC 8 cores (CEA)]	

Démarche : Valeurs de références calculées (VI)

Intégrales :

$$\begin{aligned}2E_c &= \frac{1}{D} \iiint_D (u^2 + v^2 + w^2) dx dy dz \\ \Delta P_{io} &= \frac{1}{S_i} \iint_{S_i} P dy dz - \frac{1}{S_o} \iint_{S_o} P dy dz \\ T_m &= \frac{1}{D} \iiint_D \theta dx dy dz\end{aligned}$$

Flux : de chaleur et de quantité de mouvement à travers toutes les faces ;

Locales : extrema locaux sur les profils des variables primales (u, v, w, T) et du flux de chaleur (Nu) sur les faces à températures imposées.

Démarche : Calcul des Nusselt (VII)

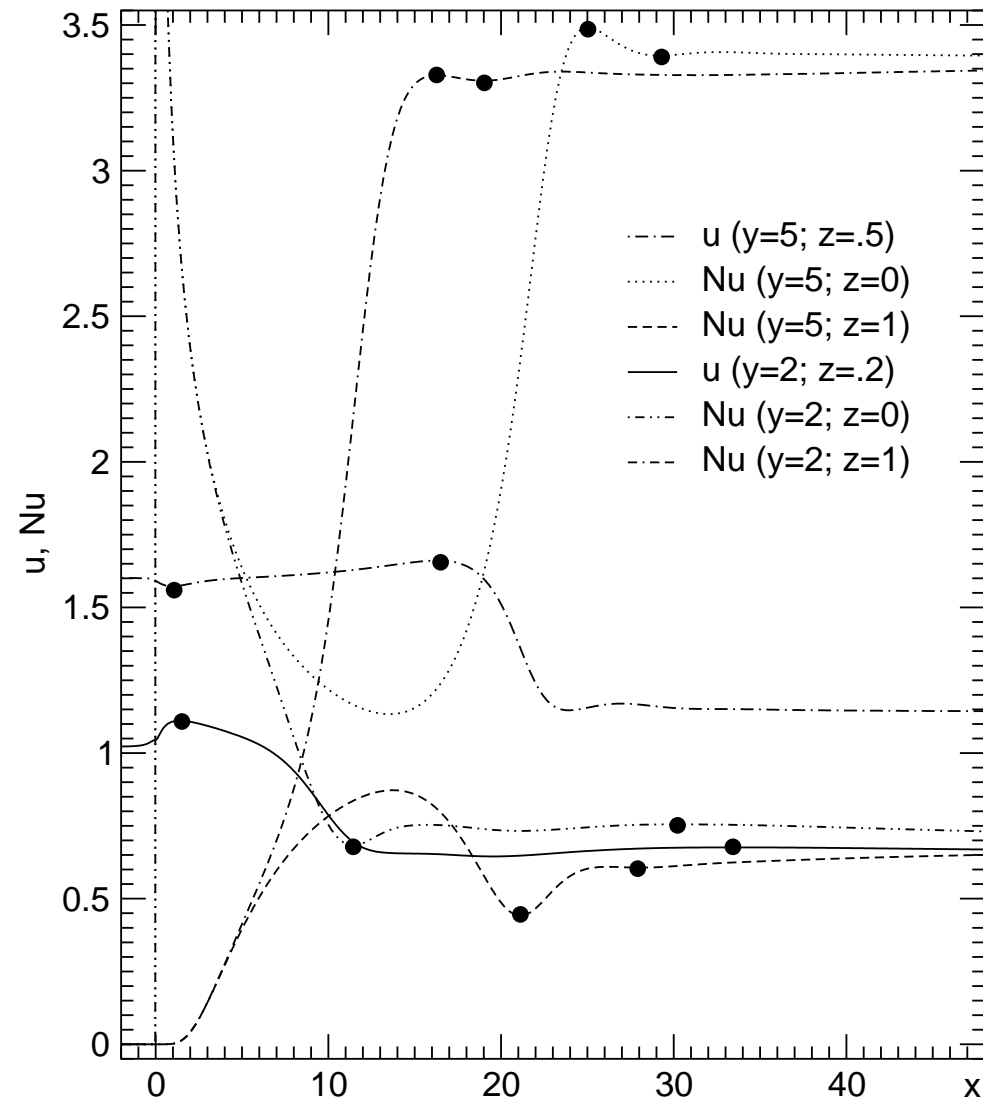
Nu calculé de deux manières par **FE4** :

Non consistante

$$Nu = -\frac{\partial \theta}{\partial n}$$

Consistante Par dualité : le flux (condition de Neumann) qu'il aurait fallu mettre à la place des conditions de Dirichlet pour obtenir la même solution.

Démarche : Exemple de profils (VIII)



Démarche : Extrapolation de Richardson (RE) (IX)

{A1} f_{exact} suffisamment régulière pour pouvoir écrire le **développement de Taylor** :

$$f_h = f_{exact} + C_\alpha h^\alpha + O(h^{\alpha+1})$$

{A2} h_i suffisamment petits pour avoir (**convergence asymptotique**) :

$$C_\alpha h_i^\alpha \gg O(h_i^{\alpha+1})$$

{A3} raffinement uniforme en espace et en temps

alors, pour trois grilles $\frac{h_1}{h_2} = \frac{h_2}{h_3}$:

$$\begin{aligned}\tilde{\alpha} &= \frac{\ln\left(\frac{f_{h_1} - f_{h_2}}{f_{h_2} - f_{h_3}}\right)}{\ln\left(\frac{h_1}{h_2}\right)} \\ \tilde{C}_\alpha &= \frac{f_{h_2} - f_{h_3}}{h_2^{\tilde{\alpha}} - h_3^{\tilde{\alpha}}} \\ \tilde{f}^{ex} &= f_{h_3} - \tilde{C}_\alpha h_3^{\tilde{\alpha}}\end{aligned}$$

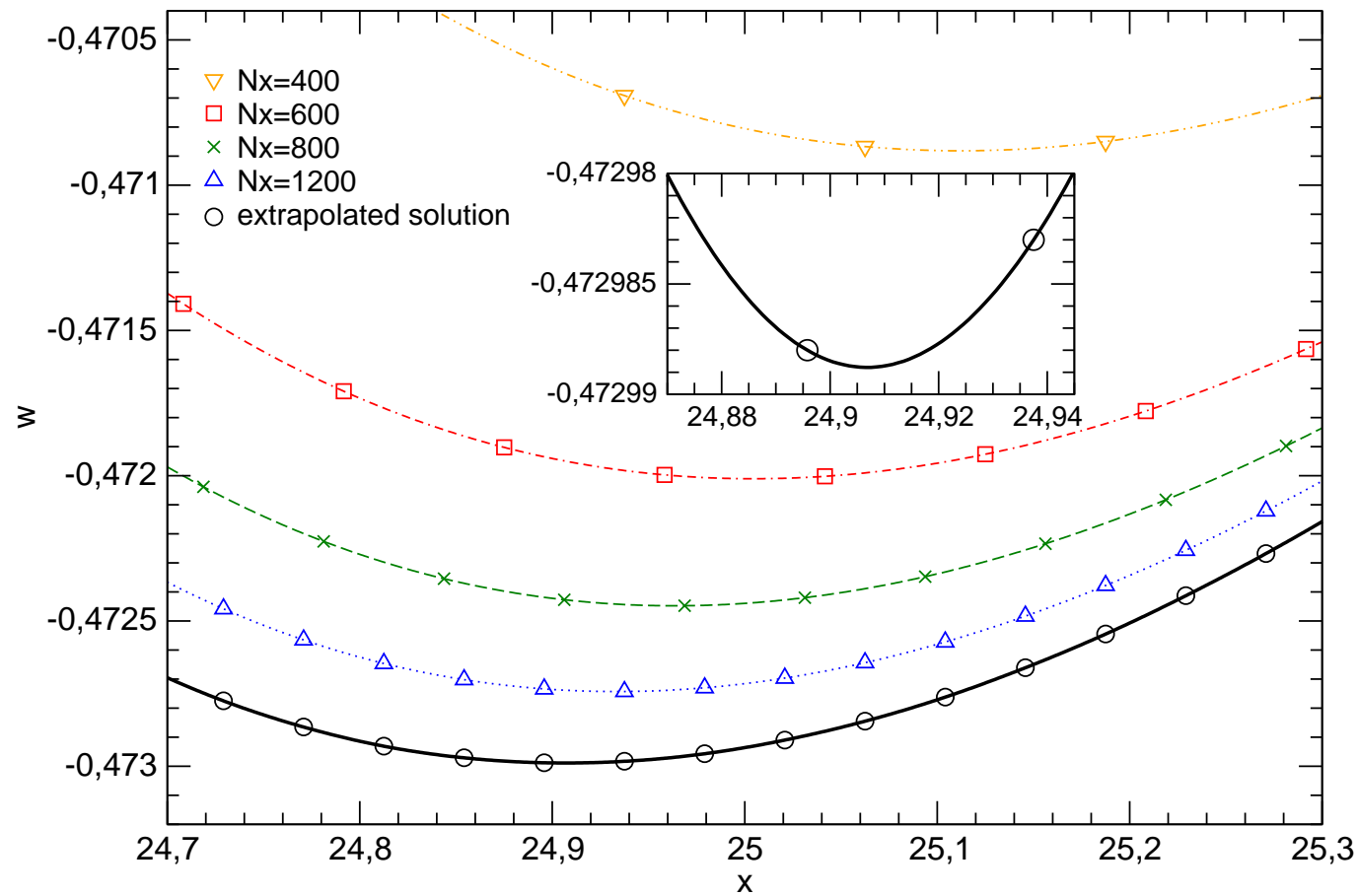
Démarche : Intérêts de l'extrapolation de Richardson (X)

Précision Éliminer le terme dominant de l'erreur de troncature, i.e. gagner un ordre ;

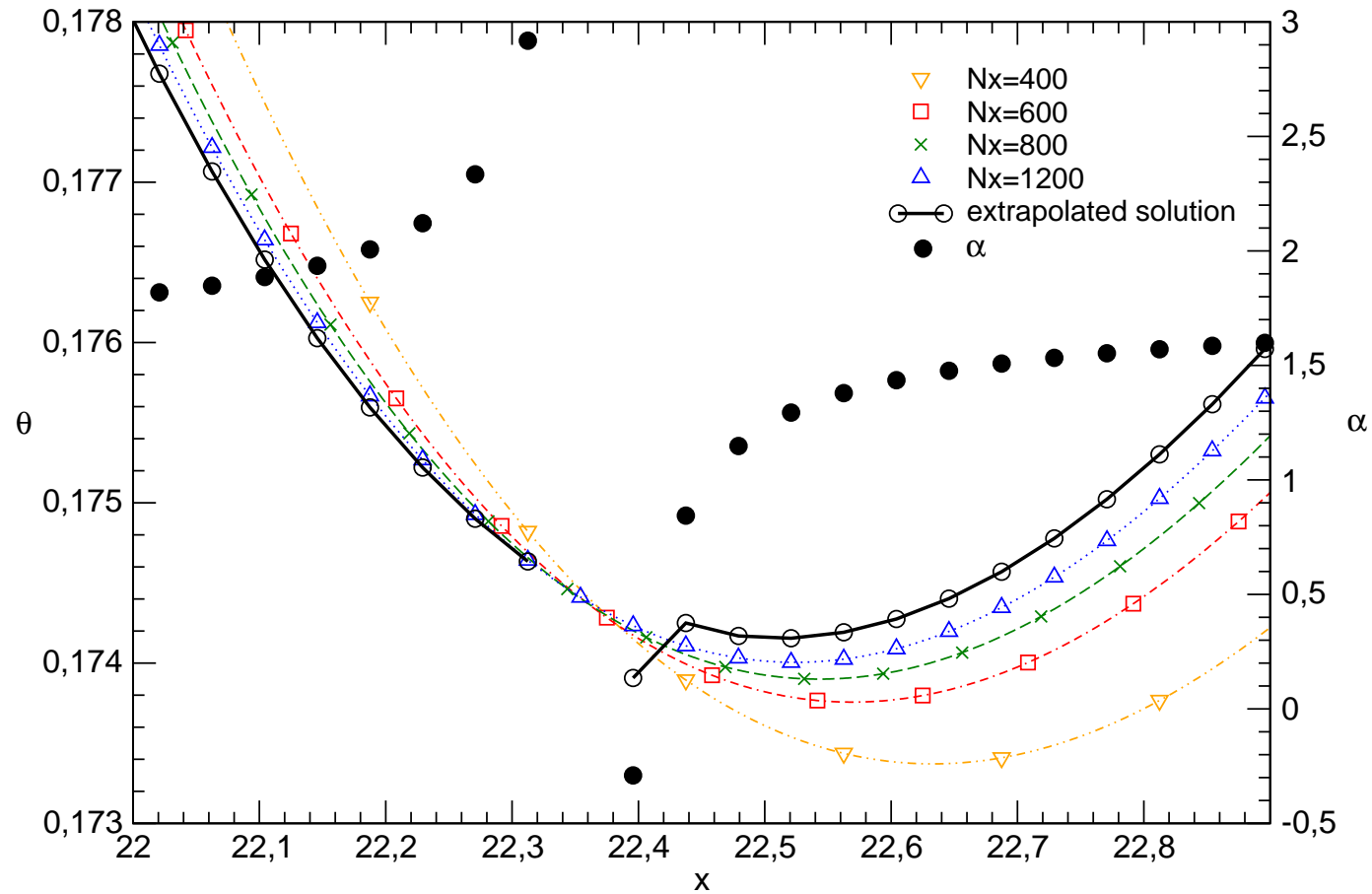
Estimation d'erreur C'est le terme dominant de l'erreur de troncature sur le maillage fin ;

Vérification Estimation des ordres de convergence.

Démarche : Exemple sur un profil (XI)



Démarche : Croisement des profils (XII)



Démarche : Remarque sur l'utilisation de RE (XIII)

De nombreux auteurs fixent le α dans le développement de Taylor à l'ordre de consistance α° du schéma utilisé.

Avantages :

- une grille en moins ;
- pas de problèmes quand les profils se croisent.

Inconvénient :

- pas de vérification de l'ordre de convergence.

Résultats : Quantités globales (I)

	FD1	FE2	FV3	FE4	References $f_{ref} \pm f_{marg}$ $f_{prec} = \frac{f_{marg}}{f_{ref}}$
$2E_c^{fg}$	1.292479	1.292452	1.292355	1.292461	1.292453 ± 0.000008 6.19×10^{-6}
$2E_c^{ex}$	1.292446	1.292452	1.292455	1.292467 °	
α_{E_c}	2.22	2.92	2.00	-1.92	
d_{E_c}	2.55×10^{-5}	2.35×10^{-7}	-7.74×10^{-5}	-5.34×10^{-6} °	
ΔP_{io}^{fg}	14.41210	14.40784	14.40235	14.40694	14.40670 ± 0.00024 1.67×10^{-5}
ΔP_{io}^{ex}	14.40647	14.40649	14.40678	14.40658 °	
$\alpha_{\Delta P_{io}}$	2.03	1.99	2.00	0.83	
$d_{\Delta P_{io}}$	3.91×10^{-4}	9.36×10^{-5}	-3.08×10^{-4}	2.55×10^{-5} °	
T_m^{fg}	0.448490	0.448625	0.448725	0.448659	0.448604 ± 0.000010 2.23×10^{-5}
T_m^{ex}	0.448594	0.448604	0.448606	0.448613	
α_{T_m}	1.19	1.18	1.02	1.18	
d_{T_m}	-2.32×10^{-4}	4.68×10^{-5}	2.65×10^{-4}	1.04×10^{-4}	

Résultats : Quantités locales (II)

	FD1	FE2	FV3	FE4	References
					$f_{\text{ref}} \pm f_{\text{marg}}$ $x_{\text{ref}} \pm x_{\text{marg}}$ $f_{\text{prec}} = \frac{f_{\text{marg}}}{f_{\text{ref}}}$
u_1	1.572726	1.572725	1.572713	1.572725	$(1572720 \pm 7) \times 10^{-6}$
x_1	0.950	0.945	0.944	0.941	0.945 ± 0.005
α_1	2.00	3.47	2.05	***	
d_1	-1.2×10^{-4}	1.3×10^{-6}	3.2×10^{-5}		4.5×10^{-6}
Nu_{t2}	0.60675	0.60658	0.60615	0.60657	0.60645 ± 0.00030
x_2	28.085	28.085	28.074	28.081	28.080 ± 0.006
α_2	1.90	1.70	1.90	1.68	
d_2	-2.5×10^{-3}	1.2×10^{-3}	2.9×10^{-3}	1.4×10^{-3}	4.9×10^{-4}
Nu_{t2}^{cons}				0.60666	
x_2^{cons}				28.077	

Résultats : Résumé des comportements observés (III)

Méthodes FD1 et FV3 RE “marche” avec un ordre observé $\alpha = \alpha^\circ = 2$ pour la plupart des quantités (sauf T_m)

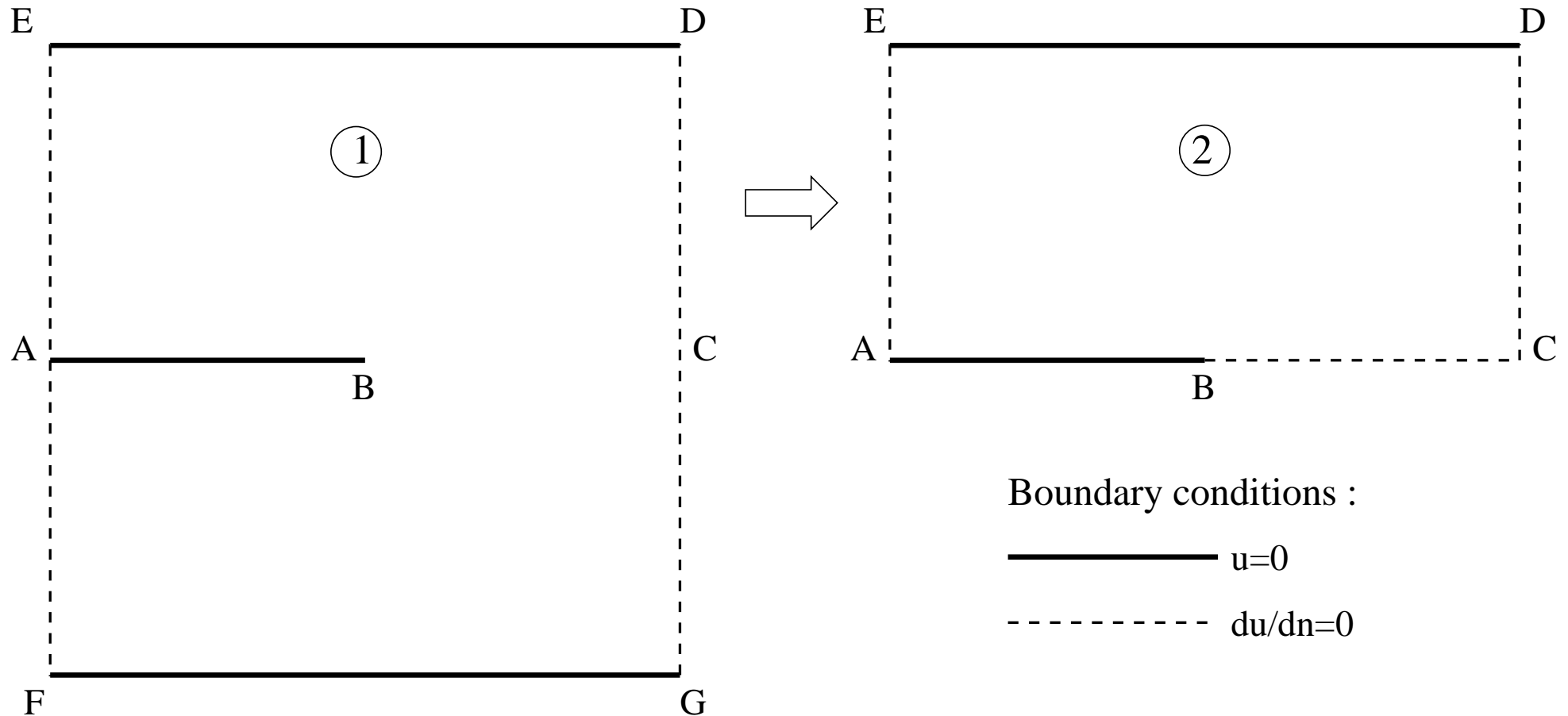
Méthodes FD1 et FV3 Solution extrapolée relativement éloignée de la solution sur la grille fine

Méthodes FE2 et FE4 Application de RE plus difficile, surtout pour **FE4**, exception faite de T_m et Nu (les quantités les plus imprécises)

Méthodes FE2 et FE4 Solution extrapolée relativement proche de la solution sur la grille fine

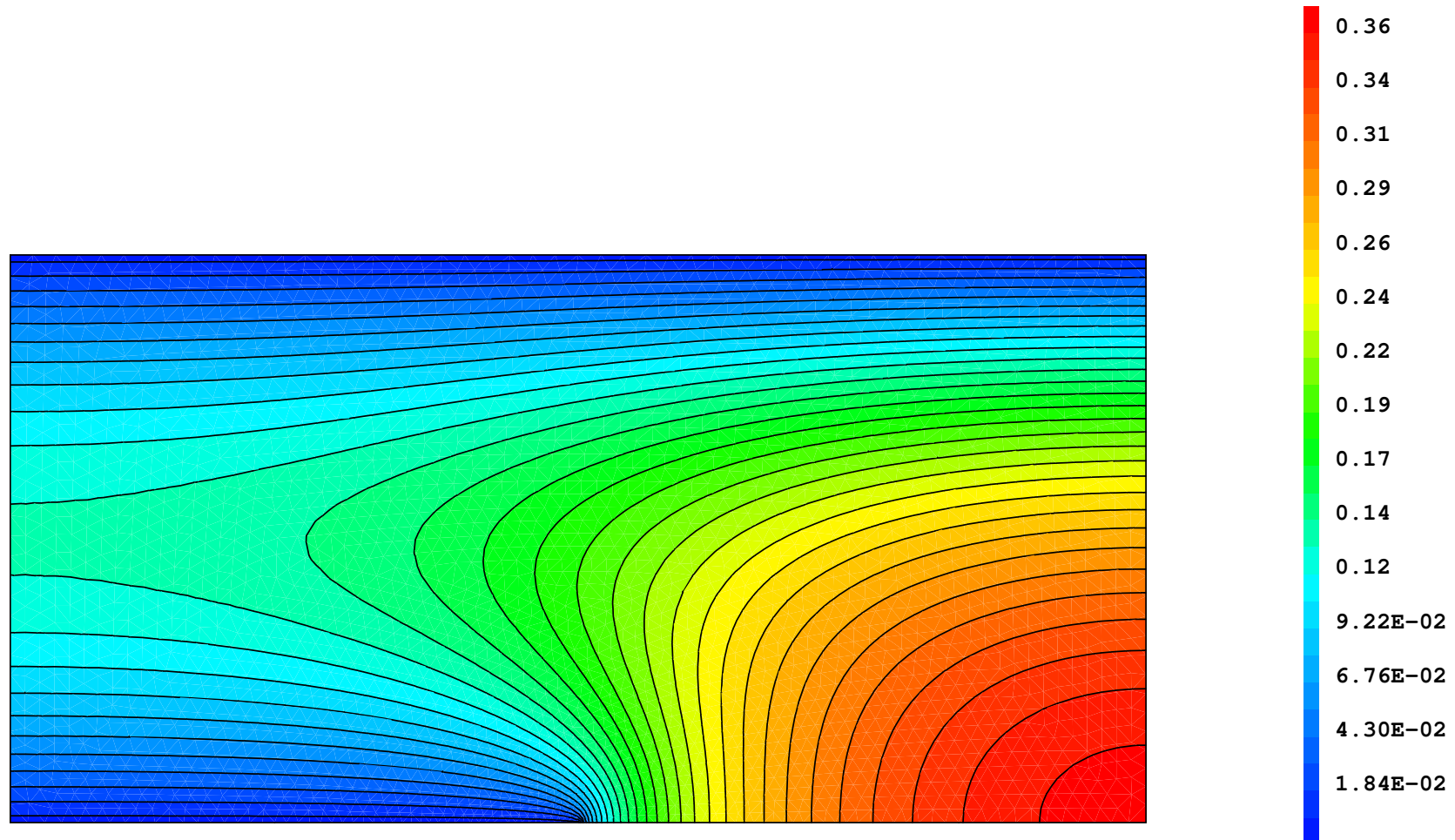
Toutes les méthodes ordre ≈ 1 pour T_m

Singularité : changement de conditions aux limites (I)



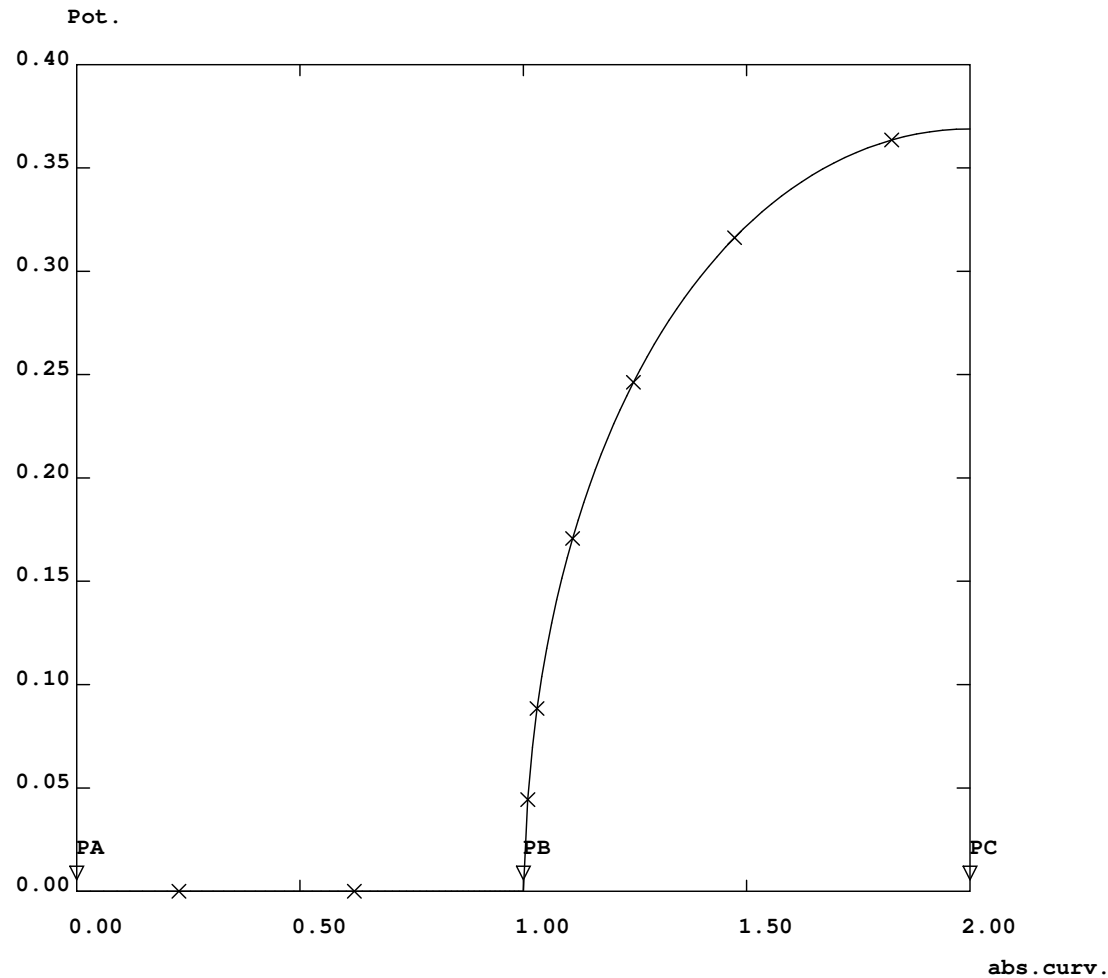
Singularité de pointe [Strang and Fix, 1988]

Singularité : exemple de solution (II)



Solution approchée de $-\Delta T = 1$.

Singularité : exemple de profil (III)



Profil de T sur la paroi du bas.

Singularité : dégradation de l'ordre de convergence (IV)

[Strang and Fix, 1988] nous dit (estimation **a priori**) :

$$f_h = f_{exact} + C_\beta h^\beta + O(h^{\beta+1})$$

où :

$$\beta = \min(r, \alpha^\circ)$$

$$\text{Ici } r = 1 \text{ et } \alpha^\circ = 2 \text{ ou } 3 \Rightarrow \boxed{\beta = 1}$$

Note : la plupart des benchmarks présentent une singularité plus ou moins marquée : cavité à paroi défilante, marche descendante, cavité différentiellement chauffée.

Singularité : problèmes soulevés (V)

Problème 1 : à part pour T_m , on a des ordres observés différents de 1, proches de α° donc pas dans la zone de convergence asymptotique. Malgré tout, l'extrapolation de Richardson semble améliorer les résultats, particulièrement pour les méthodes d'ordre 2.

Problème 2 : comment définir la solution de référence ?

Analyse RE : Développement de Taylor (I)

Idée 1 : garder deux termes dans le développement de l'erreur

$$f_h(h, C_{\alpha^\circ}, \alpha^\circ, C_r, r) = f_{exact} + C_{\alpha^\circ} h^{\alpha^\circ} + C_r h^r + O(h^{1+\max(\alpha^\circ, r)})$$

où :

- $C_{\alpha^\circ} h^{\alpha^\circ}$ terme dominant de l'erreur d'approximation de la partie **régulière** de la solution ;
- $C_r h^r$ terme dominant de l'erreur d'approximation de la partie **singulière** de la solution.

Idée 2 : $h \not\rightarrow 0$, i.e. travailler avec h_i fixées $\{h_1; h_2; h_3\} = \left\{h_1; \frac{h_1}{\tau}; \frac{h_1}{\tau^2}\right\}$ et examiner le comportement du processus d'extrapolation de Richardson lorsque C_{α°/C_r varie.

Analyse RE : fonction modèle (II)

Adimensionnement $\tilde{f}_h = \frac{f_h}{f_{exact}}$ et $\tilde{h} = \frac{h}{h_1}$

Fonction modèle

$$\tilde{f}_h(\tilde{h}, \tilde{C}_{\alpha^\circ}, \alpha^\circ, \tilde{C}_r, r) = 1 + \tilde{C}_{\alpha^\circ} \tilde{h}^{\alpha^\circ} + \tilde{C}_r \tilde{h}^r$$

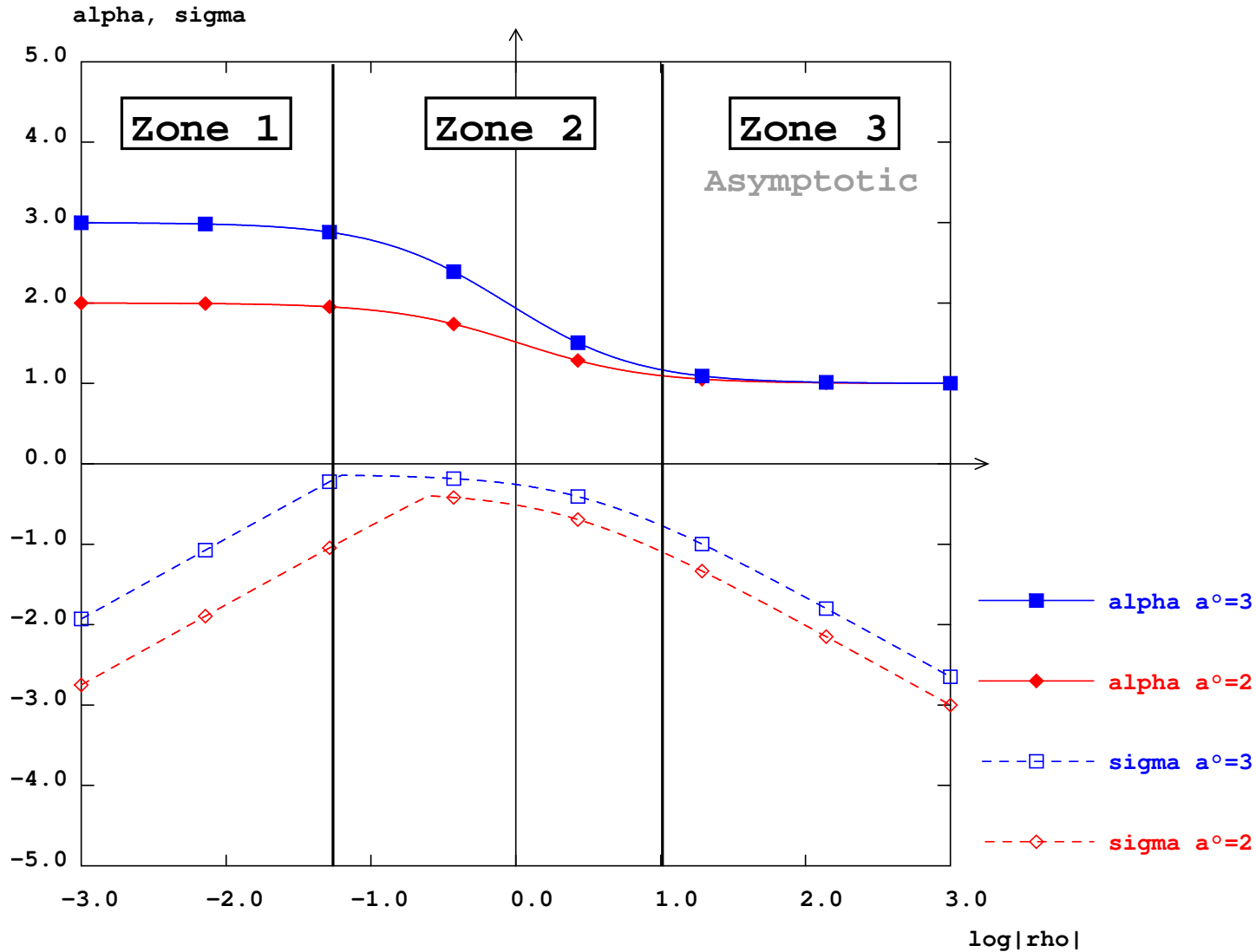
Paramètres fixés $\{h_i\} = \left\{1; \frac{1}{\tau}; \frac{1}{\tau^2}\right\}$, $\tau = 2$, $C_{\alpha^\circ} = 10^{-4} \ll 1$, $r = 1$;

Paramètres variables $\rho = C_r / C_{\alpha^\circ}$, $\alpha^\circ = 2$ ou 3 ;

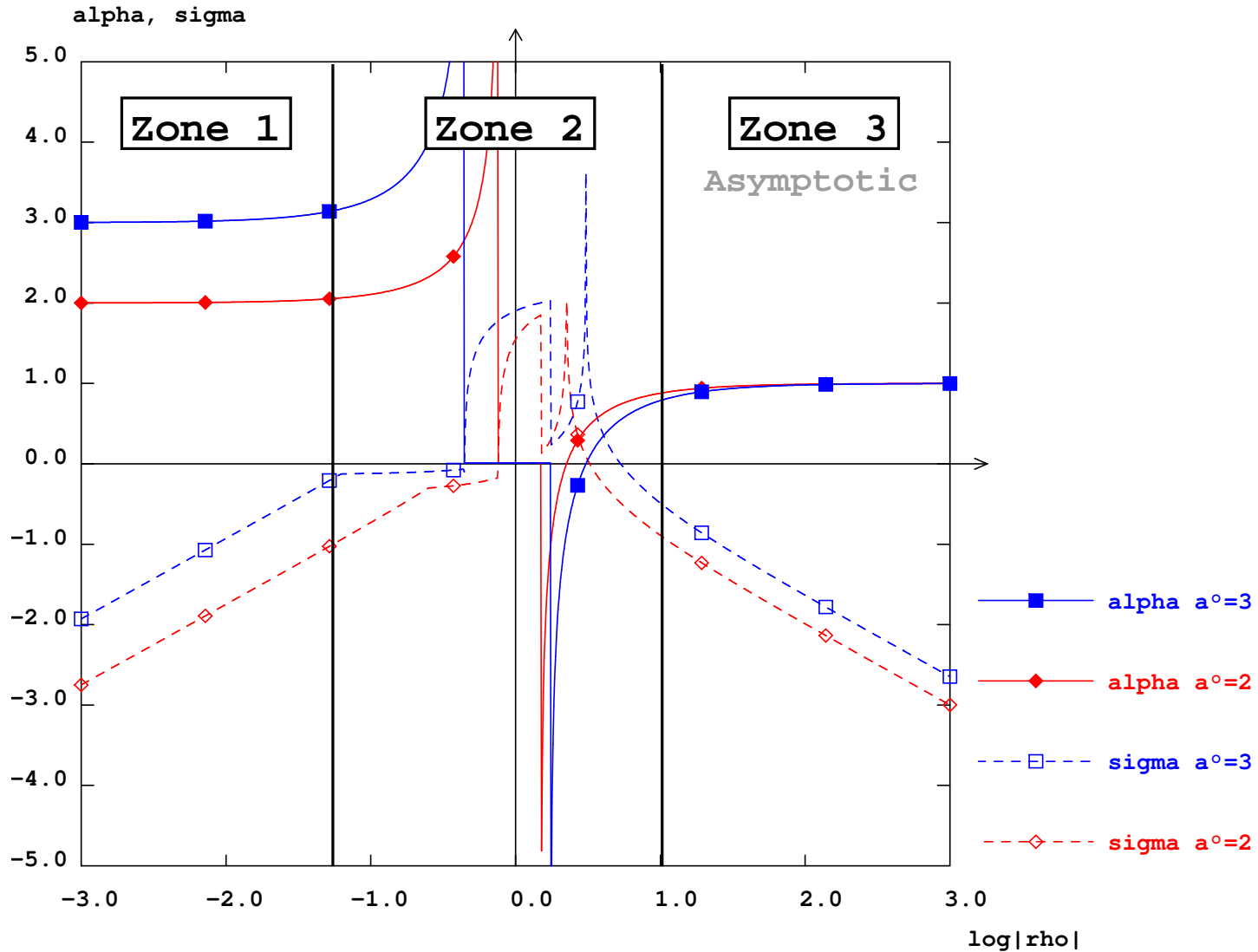
Quantités regardées α , Richardson efficiency ratio σ

$$\sigma = \log \frac{|f^{ex} - f_{exact}|}{\max(|C_{\alpha^\circ} h_3^{\alpha^\circ}|, |C_r h_3^r|)}$$

Analyse RE : $\rho = C_r / C_{\alpha^{\circ}} > 0$ (III)



Analyse RE : $\rho = C_r / C_{\alpha^0} < 0$ (IV)



Analyse RE : Analyse des graphes (V)

1. RE réduit efficacement les erreurs dans la zone 3, **mais aussi dans la zone 1** ;
2. En zone 2, le comportement de RE dépend du signe de ρ , mais l'éventuelle réduction d'erreur est faible ;
3. La zone 2 est plus large pour les méthodes d'ordre 3 que pour les méthodes d'ordre 2 ;
4. RE réduit plus efficacement l'erreur pour les méthodes d'ordre 2 que pour celles d'ordre 3.

Analyse RE : Explication des comportements observés (VI)

- Remarque 1 : **FD1** et **FV3** en zone 1, sauf pour T_m ;
- Remarque 3 : application de RE plus difficile pour **FE2** et **FE4** (zone 2 large), mais moins d'améliorations à attendre (remarque 4) ;
- Remarque 2 : explication possible du meilleur comportement de **FE2** par rapport à **FE4** pour appliquer RE.

Analyse RE : Définition de la solution de référence (VII)

- Utilisation de la valeur extrapolée si $1 \leq \alpha \leq 2.5$ pour **FD1** et **FV3** et $1 \leq \alpha \leq 4$ pour **FE2** et **FE4** ;
- sinon utilisation de la valeur obtenue sur la grille la plus fine ;
- la valeur de référence est définie comme la moyenne arithmétique des 4 valeurs et la marge d'incertitude par la demi-différence des valeurs extrêmes.

Conclusion

- Solution de référence précise (4 ou 5 chiffres significatifs) et bien documentée, pour un écoulement de convection mixte 3D ;
- Analyse du rôle de la singularité sur l'utilisation pratique de l'extrapolation de Richardson.

Perspectives

- Vérifier que l'analyse effectuée est correcte \Rightarrow maillages plus fins ;
- Appel à benchmark [Medale and Nicolas, 2006] : cas instationnaire avec une condition de sortie libre plus difficile (2D, 3D ?) ;

$$Pr = 7 \quad Re = 0.1 \quad Ra = 2500$$

- Quantification des erreurs sur Nu^{cons} .

Fin

Merci de votre attention.

Bibliographie

- [Strang and Fix, 1988]** Strang, W. and Fix, G. (1988). *An Analysis of the Finite Element Method*. Wellesley-Cambridge Press, 2nd edition. chapter 8.
- [Medale and Nicolas, 2006]** Medale, M. and Nicolas, X. (2006). Call for contributions: Towards numerical benchmark solutions for 3d mixed convection flows in rectangular channels heated from below. *International Journal of Thermal Sciences*, 45(4):331 – 333.
- [Nicolas et al., 2011c]** Nicolas, X., Medale, M., Glockner, S., and Gounand, S. (2011c). Benchmark solution for a three-dimensional mixed-convection flow, part 1: Reference solutions. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 60(5):325–345.
- [Nicolas et al., 2011a]** Nicolas, X., Gounand, S., Medale, M., and Glockner, S. (2011a). Benchmark solution for a three-dimensional mixed-convection flow, part 2: Analysis of richardson extrapolation in the presence of a singularity. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 60(5):346–369.
- [Nicolas et al., 2011b]** Nicolas, X., Medale, M., Glockner, S., and Gounand, S. (2011b). Benchmark solution for a three-dimensional mixed-convection flow—detailed technical report. Technical report. http://www.sft.asso.fr/Local/sft/dir/user-3775/documents/DocumentsDivers/SFT_Report_benchmark_PRB_2011.pdf.

Annexe : Projection Algébrique (I)

Navier-Stokes incompressible continu

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nu \Delta \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = g \end{cases}$$

Navier-Stokes discret

$$\begin{cases} A_u \mathbf{u} + Gp = \mathbf{f} \\ D\mathbf{u} = g \end{cases}$$

Linéarisation et méthode incrémentale (Newton)

$$\begin{pmatrix} A' & G \\ D & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \mathbf{u} \\ \delta p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} - A_{\mathbf{u}_i} \mathbf{u}_i - Gp_i \\ g - D\mathbf{u}_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta \mathbf{f} \\ \delta g \end{pmatrix}$$

Annexe : Projection Algébrique (II)

Factorisation LU par blocs (A inversible)

$$\begin{pmatrix} A & G \\ D & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & 0 \\ D & -DA^{-1}G \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & A^{-1}G \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

Approximation : $H \approx A^{-1}$

Factorisation LU d'une matrice tangente approchée

$$\begin{pmatrix} A & AHG \\ D & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & 0 \\ D & -DHG \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & HG \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

Annexe : Projection Algébrique (III)

Résolution par étapes (\equiv méthode de splitting)

$$\begin{pmatrix} \boxed{A}_1 & 0 \\ D & \boxed{-DHG}_2 \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} \boxed{I}_4 & HG \\ 0 & \boxed{I}_3 \end{pmatrix}}_{\begin{pmatrix} \delta \tilde{u} \\ \delta \tilde{p} \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} \delta f \\ \delta g \end{pmatrix}$$

Étape		
1	$A \delta \tilde{u} = \delta f$	Vérification du bilan des forces
2	$-DHG \delta \tilde{p} = \delta g - D \delta \tilde{u}$	Calcul du multiplicateur de Lagrange
3	$\delta p = \delta \tilde{p}$	(Laplacien discret de pression)
4	$\delta u = \delta \tilde{u} - HG \delta p$	Vérification de la contrainte (bilan de masse)

Annexe : Projection Algébrique (IV)

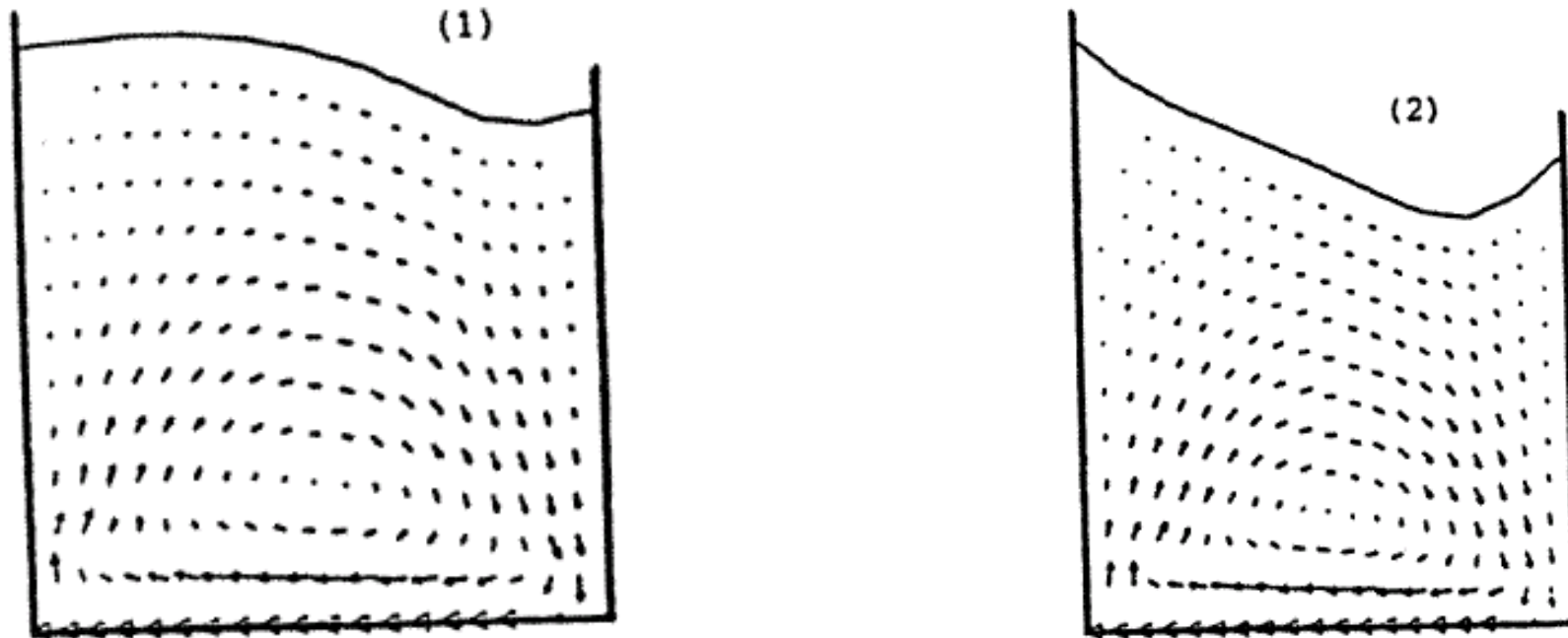
Avantages :

- Méthode efficace pour Navier-Stokes incompressible instationnaire 3D ;
- Vérification de la contrainte (bilan de masse).

Inconvénients :

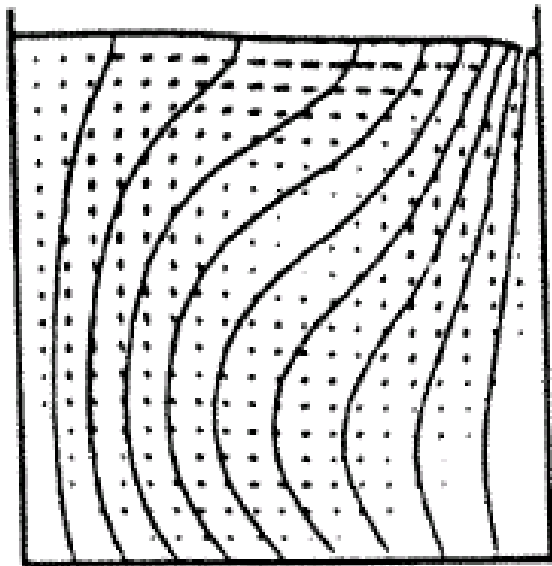
- Convergence lente si δt grand (perte d'efficacité si $H \not\approx A^{-1}$).

Annexe : Benchmark surface libre (V)

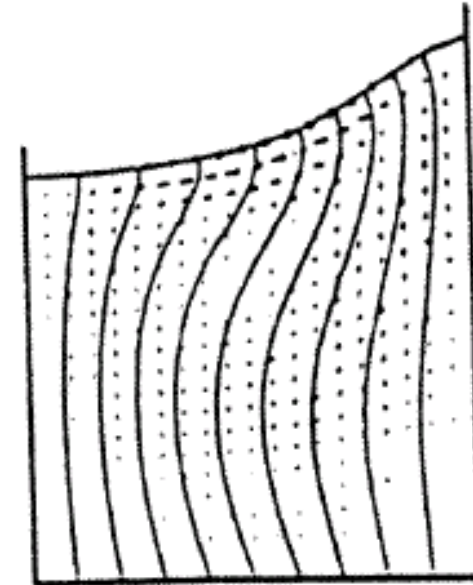


Benchmark stationnaire avec tension de surface
[Cuvelier and Schulkes, 1990]

Annexe : Benchmark surface libre (VI)



(b)



(c)

Benchmark stationnaire avec effet Marangoni [Cuvelier and Schulkes, 1990]